# SAMENVATTING VAN HET COLLEGE

# STRUCTUUR DER MATERIE II (VASTE STOF)

aangevuld met vraagstukken

door

prof.dr. H.W. de Wijn

## KRISTALSTRUCTUUR

□ Een rooster is een verzameling punten verbonden door de roostertranslaties $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$, waarin $n_1$, $n_2$, $n_3$ gehele getallen zijn en $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ de fundamentele translatievectoren of kristalassen zijn. Het rooster beschrijft de translatiesymmetrie van het kristal.

□ De assen $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ vormen een cel met volume $|\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}|$. De cel kan door toepassing van $\vec{T}$ de gehele ruimte vullen.

□ Om een kristal te vormen bevestigen we aan elk roosterpunt een identieke basis van N atomen of ionen op de plaatsen $\vec{r}_j = x_j\vec{a} + y_j\vec{b} + z_j\vec{c}$ met $j = 1, 2 \ldots., N$. De fractionele coördinaten $x_j$ , $y_j$ , $z_j$ worden tussen 0 en 1 gekozen.

□ Rooster, translatievectoren en cel worden primitief genoemd voor het minimale celvolume waarvoor het nog mogelijk is de kristalstructuur op te bouwen met roostertranslaties en een basis op elk roosterpunt. De primitieve cel bevat één roosterpunt van het primitieve rooster.

□ Roosters worden niet alleen in zichzelf overgevoerd door roostertranslaties, maar ook door puntsymmetrie-operaties (rotatie om as, spiegeling om vlak, inversie om punt). Voor roosters zijn alleen 1, 2, 3, 4 en 6-tallige rotaties mogelijk.

26 □ De mogelijke groepen van puntsymmetrie-operatoren leiden tot min of meer strenge beperkingen in de keuze van de primitieve $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$. Zo ontstaan er in drie dimensies 14 Bravais-roosters, een trikliene en 13 speciale. De belangrijkste speciale zijn sc, bcc, fcc, tetragonaal en hexagonaal.

□ Het is veelal handiger, in het bijzonder voor fcc en bcc, de conventionele cel te gebruiken in plaats van de primitieve.

27 ☐ Een vlak wordt aangegeven met de Miller-indices (h k l) en een richting door [h k l].

28 ☐ Belangrijke eenvoudige kristalstructuren zijn NaCl, CsCl, hcp en diamant.

29 ☐ Röntgenstralen (elektronen, neutronen) met golflengte $\lambda$ vallend op een kristal onder een willekeurige hoek zullen in het algemeen niet gereflecteerd (elastisch verstrooid) worden.

30 ☐ De Bragg-voorwaarde voor constructieve reflectie aan opeenvolgende vlakken luidt $2d\sin\Theta = n\lambda$.

DIAMAGNETISME EN PARAMAGNETISME

31 ☐ De susceptibiliteit $\chi$ wordt gedefinieerd door $\chi = \mu_0 M/B$, waarin M, de magnetisatie, het totale magnetisch moment per volume-eenheid (per gram, per mol) is. Stoffen met $\chi > 0$ heten paramagnetisch, met $\chi < 0$ diamagnetisch.

32 ☐ Een magnetisch veld B aangelegd op een atoom induceert een extra hoekfrequentie op de precessie van de elektronen ter grootte $\omega = eB/2m$ (Larmor-precessie).

33 ☐ De diamagnetische susceptibiliteit van N atomen met atoomnummer Z is $\chi = -\mu_0 NZe^2\langle r^2\rangle/6m$, waarin $\langle r^2\rangle$ het gemiddelde kwadraat van de atomaire straal is (Langevin).

34 ☐ Ionen van de overgangselementen bezitten een permanent magnetisch moment. Belangrijkste zijn de ijzergroep (3d-reeks) en de zeldzame aarden (4f-reeks).

35 ☐ Atomen met een permanent moment $\mu$ hebben volgens de klassieke afleiding een magnetisatie $M = N\mu L(\mu B/k_BT)$, waarin $L(x)$ de Langevin-funktie is. Voor $\mu B \ll k_BT$ is de paramagnetische susceptibiliteit $\chi = N\mu^2/3k_BT$ (Curie-wet).

36 ☐ Voor een systeem van spins $S = \frac{1}{2}$ is de, quantummechanisch juiste, magnetisatie $M = N\mu\tanh(\mu B/k_BT)$, waarin $\mu = \frac{1}{2}g\mu_B$ (Brillouin). Voor $\mu B \ll k_BT$ is de paramagnetische susceptibiliteit $\chi = C/T$ met $C = N\mu^2/k_B$ (Curie-wet; Algemeen: $C = NS(S+1)g^2\mu_B^2/3k_B$).

FERROMAGNETISME EN ANTIFERROMAGNETISME

37 ☐ In ferromagneten is er "exchange" tussen (naburige) spins, die de spins parallel wil oriënteren tegen de temperatuurbeweging in. Beneden de Curie-temperatuur $T_c$ treedt een geordend magnetisme op met een spontane magnetisatie. Voor $T > T_c$ verdwijnt de spontane magnetisatie en is de ferromagneet in de paramagnetische fase.

38 ☐ In de gemiddelde veldbenadering (Weiss) wordt de exchange voorgesteld door het moleculaire- of Weissveld $\vec{B}_E = \lambda\vec{M}$. Het effectieve veld werkend op een magnetisch moment in een ferromagneet is dan $\vec{B}_a + \lambda\vec{M}$, waarin $\vec{B}_a$ het uitwendig aangelegde veld is.

39 ☐ De susceptibiliteit van een ferromagneet boven de Curie-temperatuur heeft de vorm $\chi = C/(T-T_c)$ in de gemiddelde veldbenadering, waarin $T_c = \lambda C$.

40 ☐ Domeinen met verschillend gerichte spontane magnetisatie (Weiss-gebieden) worden gescheiden door Bloch-wanden. Bij aanleggen van een uitwendig veld verschuiven de Bloch-wanden eerst reversibel, vervolgens irreversibel, waarna de magnetisaties omkeren.

41 ☐ De spontane magnetisatie neemt af met de temperatuur en verdwijnt bij $T_c$. Voor $S = \frac{1}{2}$ zonder uitwendig veld vinden we $M(T)$ uit $\tanh(m/t) = m$, waarin $m = M/N\mu$ en $t = T/T_c$.

42 ☐ In antiferromagneten, waarin de exchange naburige spins antiparallel tracht te oriënteren, komt orde voor beneden de Néel-temperatuur $T_N$. Er zijn dan twee identieke subroosters met gelijke maar antiparallelle magnetisaties.

43 ☐ Boven de Néel-temperatuur heeft de susceptibiliteit van een antiferromagneet de gedaante $\chi = 2C/(T+\Theta)$ in de gemiddelde veldbenadering. Wordt exchange slechts tussen de subroosters meegenomen dan $\Theta = T_N = \mu C$.

☐ In ferrimagneten zijn de magnetisaties van twee subroosters antiparallel, maar in absolute waarde niet gelijk.

DIELEKTRICA

44 ☐ Het macroscopisch veld $\vec{E}$, i.e., het gemiddelde veld over het volume van een kristalcel of enkele kristalcellen, wordt ingevuld in de Maxwell-vergelijkingen. We kunnen hiermee werken zolang we de relatie tussen de polarisatie $\vec{P}$ en $\vec{E}$ kennen, en zolang de golflengten van de elektromagnetische straling lang zijn ten opzichte van de roosterafstand.

☐ Het elektrisch veld ter plaatse $\vec{r}_j$ op een atoom j, heet het lokale veld $\vec{E}_{lok}(\vec{r}_j)$. Het is de som van de elektrische velden afkomstig van alle ladingen en dipolen buiten het atoom.

☐ Het lokale veld wordt berekend met $\vec{E}_{lok}(\vec{r}_j) = \vec{E}_0 + \vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3(\vec{r}_j)$, waarin

$\vec{E}_0$ = veld afkomstig van alle ladingen buiten het dielektricum,

$\vec{E}_1$ = depolarisatieveld samenhangend met de vorm van het specimen,

(macro)

$\vec{E}_2$ = Lorentz-veld, het veld ten gevolge van de polarisatie van het dielektricum buiten de Lorentz-holte (mathematische fictie, bol met straal van zeg 10 roosterafstanden) om $\vec{r}_j$,

$\vec{E}_3(\vec{r}_j)$ = veld op $\vec{r}_j$ ten gevolge van de dipolen op atomen binnen de Lorentz-holte.

De totale bijdrage van de polarisatie van het dielektricum wordt op deze wijze beschreven door $\vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3(\vec{r}_j)$, waarbij $\vec{E}_3(\vec{r}_j)$ de enige bijdrage is die binnen een kristalcel van de plaats afhangt.

☐ Het dielektricum buiten de Lorentz-holte wordt opgevat als een continuum. De velden $\vec{E}_1$ en $\vec{E}_2$ worden nu berekend als afkomstig te zijn van een (fictieve) oppervlaktelading $\vec{n}.\vec{P}$ respectievelijk op het buitenoppervlak van het specimen en de rand van de Lorentz-holte.

45 Specimens in de vorm van een ellipsoide hebben de eigenschap dat een homogeen uitwendig veld $\vec{E}_0$ een homogene polarisatie $\vec{P}$ en een homogene $\vec{E}_1$ produceert. Het depolarisatieveld voor een ellipsoide is $E_{1\mu} = -N_{\mu\nu}P_\nu/\varepsilon_0$, waarin $N_{\mu\nu}$ de depolarisatietensor is. $N_{\mu\nu}$ hangt slechts af van de geometrie. Voor een bol:
$N = 1/3$ en $\vec{E}_1 = -\vec{P}/3\varepsilon_0$.

Het macroscopisch veld $\vec{E}$ van de Maxwell-vergelijkingen is gelijk aan $\vec{E}_0 + \vec{E}_1$.

1 Het Lorentz-veld is $\vec{E}_2 = \vec{P}/3\varepsilon_0$.

2 $\vec{E}_3$ moet worden berekend door roostersommatie binnen de Lorentz-holte over het dipoolveld

$$\vec{E}_{dip}(\vec{r}) = \frac{3(\vec{p}.\vec{r})\vec{r} - r^2\vec{p}}{4\pi\varepsilon_0 r^5}$$

Voor een plaats $\vec{r}_j$ met kubische puntsymmetrie is de roostersommatie van het dipoolveld nul: $\vec{E}_3 = \vec{0}$.
Voorts geldt in dit geval de Lorentz-relatie
$\vec{E}_{lok} = \vec{E} + \vec{P}/3\varepsilon_0$.

De dielektrische susceptibiliteit $\chi$ en de dielektrische constante $\varepsilon$ zijn gedefinieerd in termen van het macroscopisch veld door $\chi = P/\varepsilon_0 E$ en $\vec{D} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P} = \varepsilon\varepsilon_0\vec{E}$.
Er geldt $\chi = \varepsilon - 1$.

3 De polariseerbaarheid $\alpha$ van een atoom of ion is gedefinieerd in termen van het lokale veld, $\vec{p} = \alpha\vec{E}_{lok}$, waarin $\vec{p}$ het dipoolmoment van het atoom of ion is.

Voor een atoom op een plaats met kubische symmetrie geldt de Clausius-Mossotti-relatie

$$\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+2} = \frac{1}{3\varepsilon_0}\sum N_j\alpha_j.$$

4 De belangrijkste bijdragen tot de polariseerbaarheid zijn (a) de dipolaire (oriëntatie) polariseerbaarheid ten gevolge van oriëntatie van permanente dipolen, (b) de ionische ten gevolge van verplaatsing van ionen in een kristalrooster, en (c) de elektronische ten gevolge van in atomen of ionen geinduceerde momenten.

5 ☐ Als funktie van de frequentie, verdwijnt eerst de dipolaire bij radio en microgolffrequenties, daarna de ionische in het infrarood, en tenslotte de elektronische in het zichtbare gebied.

6 ☐ Uit de klassieke theorie (Lorentz) volgt met verwaarlozing van demping $\alpha(\text{elektronisch}) = e^2/m(\omega_0^2-\omega^2)$, waarin $\omega_0$ de eigenfrequentie van het harmonisch aan het atoom gebonden elektron.

7 ☐ De bijdrage tot de statische polariseerbaarheid ten gevolge van oriëntatie van permanente elektrische dipolen $\vec{p}$ tegen de temperatuurbeweging in, wordt gegeven door $\alpha(\text{dipolair}) = p^2/3k_BT$ in de limiet $pE \ll k_BT$ (Langevin).

FERMI GAS VAN VRIJE ELEKTRONEN

☐ In een metaal doen de atomen afstand van hun valentie elektronen. Deze vormen een "gas" van geleidingselektronen, die zich door het gehele volume van het metaal bewegen.

8 ☐ In het vrije-elektron model wordt de interactie van een geleidingselektron met de atomen op het rooster en andere geleidingselektronen verwaarloosd, zodat er alleen kinetische energie is. Een vrij-elektron Fermi gas is een gas van vrije elektronen onderworpen aan het Pauli-principe.

☐ Aan de bijbehorende Schrödinger-vergelijking $-(\hbar^2/2m)\Delta\Psi = E\Psi$ voldoen de lopende golven $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}.\vec{r})$, waarin $\vec{k}$ de golfvector, met de eigenwaarden $\varepsilon_{\vec{k}} = (\hbar^2/2m)(k_x^2+k_y^2+k_z^2) = (\hbar^2/2m)k^2$. De bijbehorende impuls is $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

☐ We laten de golffunkties voldoen aan de periodieke randvoorwaarden (mathematische abstractie om ons te kunnen beperken tot eindig volume): $\Psi(x+L,y,z) = \Psi(x,y,z)$, etc., waarbij L zeer groot ten opzichte van de roosterafstand .

9 De toegestane $\vec{k}$ waarden zijn dan $k_x$, $k_y$, $k_z$ = $2\pi n/L$ met n geheel. In de $\vec{k}$ ruimte is één toegestaan punt per volume-element $(2\pi/L)^3$ voor drie dimensies.

☐ Het Pauli-principe schrijft voor dat voor elke waarde van $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ slechts twee elektronen mogen voorkomen met spin ↑ respectievelijk ↓ ($S = \frac{1}{2}$, $m_S = \pm\frac{1}{2}$).

10 ☐ De Fermi-energie $\varepsilon_F = (\hbar^2/2m)k_F^2$ is de energie van het hoogst gevulde niveau bij T = 0K. In drie dimensies is de Fermi-golfvector gelijk aan $k_F = (3\pi^2 N/V)^{1/3}$
Grootte orde van $\varepsilon_F$ in metalen is enkele eV, of in temperatuur uitgedrukt via $\varepsilon_F = k_B T_F$, 20000 - 100000 K.

11 ☐ Bij thermische aanslag geldt voor elektronen de Fermi-Dirac-distributie

$f(\varepsilon) = [e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1]^{-1}$, waarin $\mu(T)$ de chemische potentiaal is. Als $k_B T \ll \varepsilon_F$ worden praktisch alleen elektronen met energie juist onder het Fermi-niveau aangeslagen, terwijl in zeer goede benadering tevens geldt $\mu = \varepsilon_F$.

12 ☐ De warmtecapaciteit $C_V = (\partial E/\partial T)_V$ van een vrij elektron Fermi gas is evenredig met T, in flagrante tegenstrijd met het klassieke resultaat. De totale warmtecapaciteit bij lage temperaturen is $C_V = \gamma T + \alpha T^3$, waarin $\alpha T^3$ de bijdrage van het rooster (Debye).

13 ☐ De elektrische geleidbaarheid van een metaal wordt bepaald door twee elkaar in evenwicht houdende processen: de versnelling van de elektronen door $\vec{E}$ (driften van de Fermi-bol) en de afgifte van de door de elektronen gewonnen energie aan het rooster met een relaxatietijd $\tau$ (warmte-ontwikkeling). Resultaat is de wet van Ohm $\vec{j} = \sigma\vec{E}$ met $\sigma = ne^2\tau/m$, waarin n het aantal elektronen per volume-éénheid.

14 ☐ De specifieke elektrische weerstand $\rho = \sigma^{-1}$ bevat een temperatuur afhankelijke bijdrage ten gevolge van roostertrillingen (fononen) en een temperatuur onafhankelijke bijdrage ten gevolge van roosterfouten en onzuiverheden.

□ Een magnetisch veld $B_z$, loodrecht op een stroom $j_x$ door een metaal of halfgeleider produceert een elektrisch veld $E_y$, het Hall-veld, loodrecht op magnetisch veld en stroom. De Hall-constante voor elektronen is $R_H = E_y/j_xB_z = -1/ne$.

ENERGIEBANDEN EN HALFGELEIDERS

15 □ De geleidingselektronen ondervinden een in de ruimte periodieke potentiele energie afkomstig van de ionen op de roosterpunten. De invloed hiervan doet zich het sterkst gelden voor $\vec{k}$ waarden waarvoor Bragg-reflectie optreedt. Voor een één-atomig rooster met roosterafstand a zijn dat $k = \pm n\pi/a$ met n geheel.

16 □ Voor geleidingselektronen onderhevig aan een periodieke potentiaal is de energie niet continu, zoals gedemonstreerd kan worden met het bijna-vrije-elektron model in één dimensie. Er zijn banden, gescheiden door verboden gebieden.

□ Het bestaan van isolatoren is te danken aan de verboden energie-gebieden: Isolatoren bezitten gevulde banden. Niet geheel gevulde banden resulteren in elektrische geleiding (metalen, halfgeleiders).

17 □ Bij het absolute nulpunt heeft een halfgeleider een geheel gevulde valentieband. Bij hogere temperatuur worden elektronen thermisch geexciteerd over de verboden band naar de geleidingsband. Elektrische geleiding wordt dan mogelijk door elektronen in de geleidingsband en gaten in de valentieband (Intrinsiek gebied met $\sigma \propto e^{-E_g/2k_BT}$).

18 □ Onzuiverheden geven aanleiding tot extrinsieke geleiding, die onafhankelijk van de temperatuur is. We onderscheiden acceptoren (p-type) en donoren (n-type).

19 ☐ Een p-n overgang heeft gelijkrichtende eigenschappen: $J = J(0)[\exp(eV/k_BT)-1]$, waarin J(0) de generatiestroom is.

FONONEN EN THERMISCHE EIGENSCHAPPEN VAN ISOLATOREN

20 ☐ Het klassieke resultaat voor de warmtecapaciteit is $C_V = (\partial E/\partial T)_V = 3Nk_B$ (Dulong en Petit). Experimenteel blijkt $C_V$ van vaste stof isolatoren echter met $T^3$ naar nul te gaan.

☐ De eigenenergieën van een harmonische oscillator zijn $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$, met n = 0, 1, 2,..... Het thermisch gemiddelde quantumgetal wordt gegeven door de Planck-distributie

$\langle n \rangle = (e^{\hbar\omega/k_BT} - 1)^{-1}$.

21 ☐ In het Einstein-model wordt het rooster opgevat te bestaan uit 3N onafhankelijke en indentieke, harmonische oscillatoren. De warmtecapaciteit is dan

$$C_V = 3Nk_B\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/k_BT)}{[\exp(\hbar\omega/k_BT) - 1]^2}$$

☐ Roostertrillingen zijn uitwijkingen van de atomen van hun evenwichtspositie, die zich als lopende golven door het rooster voortplanten. Is de uitwijking evenwijdig aan de voortplantingsrichting (gegeven door de golfvector $\vec{k}$), dan is de trilling longitudinaal; is de uitwijking loodrecht op $\vec{k}$, dan transversaal. In het algemeen zijn er 1 longitudinale en 2 transversale modes voor elke $\vec{k}$.

22 ☐ In het Debye-model wordt de dispersierelatie van roostertrillingen benaderd door de dispersierelatie van een continuum $\omega(\vec{k}) = vk$. Het aantal trillingsmodes in het frequentiegebied $(\omega, \omega+d\omega)$ is dan $\mathcal{D}(\omega)d\omega = (V\omega^2/2\pi^2v^3)d\omega$.

23 □ Voorts wordt in het Debye-model het aantal toegestane modes per polarisatierichting beperkt tot het aantal deeltjes N. In formule:

$\int_0^{\omega_D} \mathcal{D}(\omega)d\omega = N$, waaruit volgt de Debye-temperatuur

$\Theta = \hbar\omega_D/k_B = (\hbar v/k_B)(6\pi^2 N/V)^{1/3}$ in drie dimensies.

24 □ In het Debye-model is de totale energie van de roostertrillingen

$$E = \int_0^{\omega_D} d\omega\, \mathcal{D}(\omega)\; n(\omega,T)\hbar\omega = 9Nk_BT\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3 \int_0^{\Theta/T} dx\, \frac{x^3}{e^x - 1}$$

25 □ In het Debye-model gaat de warmtecapaciteit bij lage temperaturen ($T \ll \Theta$) volgens de Debye $T^3$ wet,

$$C_V = \frac{12\pi^4}{5}\; Nk_B\left(\frac{T}{\Theta}\right)^3$$

en wordt bij hoge temperaturen $C_V = 3Nk_B$ bereikt.

SUPERGELEIDING

□ Supergeleiding, i.e., het afwezig zijn van elektrische weerstand, komt voor bij een groot aantal metalen en verbindingen daarvan beneden een overgangstemperatuur $T_c$.

□ Een stuk metaal in de supergeleidende toestand is een perfecte diamagneet met $\vec{M} = -\vec{B}/\mu_0$ (Meissner-effect).

□ Er zijn twee typen supergeleiders, I en II. In het type I wordt de supergeleidende toestand vernietigd door een uitwendig veld groter dan een kritisch veld $H_c$. Een type II supergeleider heeft twee kritische velden $H_{c_1}$ en $H_{c_2}$, waartussen een incompleet Meissner-effect optreedt.

□ De BCS (Bardeen Cooper Schrieffer) theorie geeft rekenschap van het bestaan van een verboden energiegebied tussen supergeleidende elektronen (Cooper-paren) benedan en normale elektronen boven het verboden gebied.

De behandelde stof is te vinden op de navolgende pagina's van Kittel, Introduction to Solid State Physics (Wiley).

| | 4th Ed. | 3rd Ed. |
|---|---|---|
| Kristalstructuur | | |
| | 2 - 31, 45 - 49 | 2 - 28, 35 - 38 |
| Diamagnetisme en Paramagnetisme | | |
| | 498 - 507 | 429 - 437 |
| Ferromagnetisme en Antiferromagnetisme | | |
| | 528 - 536, 548 - 557, 562 - 564 | 454 - 461, 472 - 483, 488 - 490 |
| Dielektrica | | |
| | 448 - 466 | 374 - 390 |
| Fermi Gas van Vrije Elektronen | | |
| | 238 - 253, 256 - 261, 287 - 289 | 198 - 213, 215 - 219, 242 - 244 |
| Energiebanden en Halfgeleiders | | |
| | 294 - 299, 360 - 364, 372, 375, 386 - 389 | 252 - 257, 300 - 302, 309, 311, 324 - 329 |
| Fononen en Thermische Eigenschappen van Isolatoren | | |
| | 168, 200 - 205, 210, 212 - 213, 215 - 218 | 142, 165 - 169, 174 - 176, 178 - 180 |
| Supergeleiders | | |
| | 398 - 407, 410 - 411 | 334 - 341, 343 - 344 |

OPGAVEN

1. <u>Diamantstruktuur</u> [Kittel 1.1]

a. Teken de kristalstruktuur van diamant.

b. Hoeveel atomen zijn er in de primitieve cel?

c. Hoe lang in Å is een primitieve translatie vector (De zijde van de conventionele kubus is 3.56 Å)?

d. Toon aan dat de hoek tussen de tetragonale bindingen gelijk is aan $109^\circ 28'$ (Aanwijzing: deze hoek is gelijk aan de hoek tussen de lichaams diagonalen van een kubus).

e. Hoeveel atomen zitten er in de conventionele cel?

2. <u>Miller indices</u> [Kittel 1.3]

Bewijs dat in een kubies kristal de richting [h k l] loodrecht is op het vlak (h k l).

3. <u>Pakking</u> [Kittel 1.4]

We plaatsen harde bollen op de roosterpunten van sc, bcc en fcc roosters. Toon aan dat de door de bollen ingenomen ruimte maximaal het navolgende gedeelte van de beschikbare ruimte is:

| | |
|---|---|
| sc | 0.52 |
| bcc | 0.68 |
| fcc | 0.74 |

4. <u>Subroosters</u> [Kittel 1.7]

Toon aan dat een bcc rooster ontbonden kan worden in twee sc roosters, A en B, zodanig dat geen enkel eerste-buur roosterpunt van een roosterpunt van A op A ligt, en van B op B. Toon ook aan dat op dezelfde wijze een sc rooster ontbonden kan worden in

twee fcc roosters, en een fcc rooster in vier sc roosters. (Deze beschouwingen zijn van belang voor antiferromagnetisme).

5. <u>Diamagnetische susceptibiliteit van atomair waterstof</u> [Kittel 15.1]

De golffunktie van het H-atoom in de grondtoestand (1s) is

$$\psi = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \exp(-r/a_0),$$

waarin $a_0 = \hbar^2/me^2 = 0.529 \times 10^{-8}$ cm (straal eerste Bohrsebaan). Volgens de statistische interpretatie van de golffunktie is de ladingsdichtheid $-e|\psi|^2$.
Toon aan dat voor deze toestand

$$\langle r^2 \rangle = 3a_0^2,$$

en bereken vervolgens de diamagnetische susceptibiliteit voor atomair waterstof ($-2.36 \times 10^{-6}$ cm$^3$/mole).

6. <u>Langevin paramagnetisme</u> [Kittel 15.2]
Toon aan dat volgens de Langevin-theorie de eerste twee termen in de reeks ontwikkeling van de differentiële susceptibiliteit zijn

(CGS) $$\chi = \frac{dM}{dB} = \left(\frac{N\mu^2}{3k_BT}\right)\left[1 - \frac{1}{5}\left(\frac{\mu B}{k_BT}\right)^2 + \ldots\right]$$

7. Schottky-anomalie in de soortelijke warmte

[Kittel 15.5]

We beschouwen een systeem van twee niveaus met energie-opsplitsing $k_B\Delta$. De splitsing kan afkomstig zijn van een magnetisch veld zoals in paramagnetische ionen.
Toon aan dat de warmtecapaciteit per systeem gelijk is aan

$$C = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\Delta = k_B \frac{(\Delta/T)^2 e^{\Delta/T}}{(1 + e^{\Delta/T})^2}$$

Teken vervolgens C als funktie van $T/\Delta$. Het vrij scherpe maximum in C heet de Schottky-anomalie, en wordt veelvuldig gebruikt voor het bepalen van afstanden tussen energieniveaus.

8. Spontane magnetisatie in de buurt van $T_c$

[Kittel 16.7]

Toon aan dat in de gemiddelde veld benadering de spontane magnetisatie van een ferromagneet van de temperatuur afhankelijk is volgens $(T_c - T)^{\frac{1}{2}}$ in het gebied juist beneden $T_c$. Experimentele gegevens suggereren dat de exponent dichter bij 0.33 ligt. Gebruik $S = \frac{1}{2}$.

9. Paramagnetische Curie-temperatuur van antiferromagneten

[Kittel 16.3]

Voor vele antiferromagneten is de paramagnetische Curie-temperatuur $\theta$ niet gelijk aan de Néel-temperatuur $T_N$.
Voor MnO is gevonden: $T_N$ = 116 K, $\theta$ = 610 K.

In het twee-subrooster model van een antiferromagneet nemen we naast de wisselwerking tussen de subroosters onderling bovendien de wisselwerking in elk rooster mee. In de gemiddelde veld benadering,

$B_A = B_a - \mu M_B - \varepsilon M_A$ ,

$B_B = B_a - \mu M_A - \varepsilon M_B$ .

Toon aan dat dan

$$\theta/T_N = (\mu+\varepsilon) / (\mu-\varepsilon).$$

10. **Roostersommatie**

Plaats dipolen op de roosterpunten van een sc-rooster, parallel aan de c-as. Toon aan dat het veld op een roosterpunt afkomstig van zijn eerste buren nul is. Toon hetzelfde aan voor de tweede buren.

11. **Polariseerbaarheid van atomair waterstof**

[Kittel 13.1]

We nemen een semiklassiek model voor de grondtoestand van het H atoom in een elektrisch veld, loodrecht op de baan van het elektron. Toon aan dat voor dit model $\alpha = 4\pi\varepsilon_o a_o^3$ , waarin $a_o$ de straal van de eerste Bohrse-baan.

(Aanwijzing: Als het aangelegde veld in de x richting is, moet de x component van het veld van de kern ter plaatse van het elektron het aangelegde veld juist compenseren). Het juiste quantummechanisch resultaat is $9a_o^3/2$.

12. **Kubische holte in diëlektricum**

[Kittel 13.2]

Voor het lokale veld probleem is het niet noodzakelijk de holte bolvormig te kiezen. Het kan bijvoorbeeld ook een kubus zijn met een van de zijvlakken loodrecht op $\vec{P}$. In dit geval is de polarisatieladingsdichtheid op het onder- en bovenvlak $\pm P$, terwijl de zijvlakken geen lading hebben.
Toon aan dat in het centrum van deze holte $E_2 = P/3\varepsilon_o$, zoals we ook hebben gevonden voor een bolvormige holte.

13. Diëlektrische constante van een gedempte oscillator

[Kittel 13.7]

Veronderstel dat een gedempte oscillator met massa $m$ en lading $q$ voldoet aan de bewegingsvergelijking

$$m\left(\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{1}{\tau}\frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x\right) = qE_0 e^{-i\omega t}$$

waarin $\tau$ , de relaxatietijd, de demping beschrijft. In geval van een elektron is dit juist de klassieke beschrijving in de stijl van Lorentz.

a. Met verwaarlozing van interactie tussen de oscillatoren, wordt gevraagd aan te tonen dat de bijdrage van $N$ van dergelijke oscillatoren per volume eenheid is

$$\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon'' = 1 + \frac{Nq^2/\varepsilon_0 m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega/\tau}$$

b. Schets, aannemend $\omega_0\tau \gg 1$ (weinig demping) de afhankelijkheid van $\varepsilon'$ en $\varepsilon''$ van de frequentie.

14. Kinetische energie van elektrongas

[Kittel 7.2]

Toon aan dat de kinetische energie van een drie-dimensionaal gas van $N$ vrije elektronen bij 0 K is

$$E = \frac{3}{5}N\varepsilon_F$$

15. Vloeibaar $^3He$ [Kittel 7.7]

Het atoom $^3He$ heeft spin $\frac{1}{2}$ en is een fermion. De dichtheid van vloeibaar $^3He$ is 0.081 g cm$^{-3}$ in de nabijheid van het absolute nulpunt. Bereken de Fermi-energie en de Fermi-temperatuur.

16. **Fermi gassen in de astrofysica**

[Kittel 7.6]

a. De massa van de zon is $2 \times 10^{33}$ gram. Schat hieruit het aantal elektronen in de zon. In een witte dwergster zijn waarschijnlijk deze elektronen alle geioniseerd en opgeborgen in een bol met straal $2 \times 10^{9}$ cm. Bereken de Fermi-energie voor dit geval in eV.

b. De energie van een elektron in de relativistische limiet $\varepsilon \gg mc^2$ is verbonden met golfvector door $\varepsilon \approx pc = \hbar ck$. Toon aan dat de Fermi-energie in deze limiet ruwweg is $\varepsilon_F \approx \hbar c(N/V)^{1/3}$.

c. Als het bovenstaande aantal elektronen aanwezig zou zijn in een pulsar met straal 10 km, dan zou de Fermi-energie ongeveer $10^8$ eV bedragen. Toon dit aan. (De hoge waarde verklaart waarom men denkt dat pulsars voornamelijk uit neutronen bestaan in plaats van protonen en elektronen. Bij het verval van het neutron, $n \rightarrow p + e^-$, komt slechts $0.8 \times 10^6$ eV vrij. Het verval van neutronen gaat slechts door tot een Fermi-niveau van $0.8 \times 10^6$ eV is opgebouwd).

17. **Chemische potentiaal**

[Kittel 7.4]

Vind een exacte transcendente vergelijking voor de chemische potentiaal $\mu(T)$ voor een Fermi gas in twee dimensies. Aanwijzing: De toestandsdichtheid van een vrij elektrongas in twee dimensies is onafhankelijk van de energie: $\mathcal{D}(\varepsilon) = m/\pi\hbar^2$ per oppervlakte-eenheid.

18. **Fermi-Dirac statistiek van elektrontoestanden in een metaal**

Hoe groot is de waarschijnlijkheid dat een elektrontoestand, die 0.1 eV boven het Fermi-niveau ligt, bezet is bij 300 K? Beantwoord hetzelfde voor een toestand 0.1 eV beneden het Fermi-niveau. Tenslotte dezelfde twee vragen bij 4.2 K.

19. **Wet van Ohm**

De relaxatietijd $\tau$ van geleidingselektronen in koper is $2.7 \times 10^{-14}$ sec bij 300 K. Bereken de gemiddelde toename van de snelheid tussen twee botsingen wanneer een elektrisch veld van 1 V/cm wordt aangelegd. Vergelijk dit met de snelheid van een elektron aan het Fermi-niveau ($\varepsilon_F$ = 7.0 eV voor Cu; bedenk dat $mv = \hbar k$).
Het resultaat geeft een indicatie over eventuele afwijkingen van lineariteit in de relatie tussen spanning en stroom.

20. **Reciproke rooster**

a. Als $\vec{a}$ , $\vec{b}$ en $\vec{c}$ de basisvectoren van de primitieve cel van een rooster in de gewone ruimte zijn, dan wordt het bijbehorende "reciproke rooster" gedefinieerd door alle reciproke roosterpunten (in 3D = 3 dimensies)

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \qquad \text{(h, k, l gehele getallen)}$$

met primitieve reciproke translatievectoren

$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$ $\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c}\times\vec{a}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$ $\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a}\times\vec{b}}{\vec{a}.\vec{b}\times\vec{c}}$

Toon aan dat het reciproke rooster van een sc rooster met roosterafstand a een sc rooster is met roosterafstand $2\pi/a$. Maak hierbij een tekening.

b. Hoe ziet het reciproke rooster eruit voor een vierkant (2D sc) rooster?. En voor het 1D geval van een rij atomen op gelijke afstand? Maak weer tekeningen.

c. Een methode om een primitieve cel te vinden is als volgt: Trek vanuit een gegeven roosterpunt lijnen naar alle nabij gelegen roosterpunten.
Construeer vervolgens de middelloodvlakken bij deze lijnstukken. Het kleinste volume dat op deze wijze rond het oorspronkelijke roosterpunt wordt gevonden is de z.g. Wigner-Seitz primitieve cel. Teken de Wigner-Seitz primitieve cel voor sc in 3D, 2D en 1D. Wat is de inhoud van de cel in deze gevallen?

d. De 1ste Brillouinzone is gedefinieerd als de Wigner-Seitz primitieve cel in het reciproke rooster. Teken deze voor sc in 3D, 2D en 1D. Wat is de inhoud van de 1ste Brillouinzone in deze gevallen?

21. <u>Vrije-elektron energie voor vierkant rooster</u>

a. We beschouwen 2D sc rooster. Schets in een perspectivische tekening kinetische energie van een vrije elektron $\varepsilon$ als funktie van $k_x$ en $k_y$. Geef aan de doorsnijding van $\varepsilon$ met de randen van de 1ste Brillouinzone.

b. Toon aan dat voor een 2D sc rooster de kinetische energie van een vrij elektron in een hoekpunt van de 1ste Brillouinzone juist 2 keer groter is dan op het midden van een zijvlak van de zone. Hoe groot zou de factor zijn in 3D?

22. Vorm Fermi-oppervlak

a. Voor het gemak, wederom in 2D. Door interactie met roosterpunten wordt de energie juist binnen de rand van de 1ste Brillouinzone verlaagd, juist daarbuiten verhoogd. (Dit is op college aangetoond voor 1D, maar geldt onverkort voor 2D en 3D). Teken enkele doorsneden van $\varepsilon$ als funktie van $k_x$ en $k_y$ (b.v. de doorsneden $k_y = 0$ en $k_x = k_y$ ).

b. In het vrij elektronmodel is het Fermi-oppervlak een cirkel: $\varepsilon_F = (\hbar^2/2m)k_F^2$ . Hoe komt het Fermi-oppervlak er nu ruwweg uit te zien bij geleidelijke opvulling van de elektrontoestanden?

23. Koper(I) oxyde [Kittel 11.5]

$Cu_2O$ is gewoonlijk een p-type halfgeleider. Dit wordt toegeschreven aan een tekort van een van de samenstellende componenten.

a. Welke component is er te weinig aanwezig?

b. $Cu_2O$ in de vorm van dunne plaatjes is rood als er licht doorvalt. Waarom?

24. Roostertrillingen in een vierkant rooster [Kittel 5.1]

We beschouwen de transversale vibraties van een vierkant 2D sc rooster, opgebouwd uit rijen en kolommen van identieke atomen. De massa van elk atoom is M, terwijl C de krachtsconstante is van de harmonische potentiaal tussen naaste buren.

a. Als $u_{lm}$ de verplaatsing is van het atoom in de l'de rij en m'de kolom, toon dan aan dat de bewegingsvergelijking is

$$M(d^2u_{lm}/dt^2) = C[(u_{l+1,m} + u_{l-1,m} - 2u_{lm}) +$$

$$+ (u_{l,m+1} + u_{l,m-1} - 2u_{lm})]$$

b. Neem aan dat de oplossingen hiervan zijn de lopende roostergolven

$$u_{lm} = u(0) \exp[i(lK_xa + mK_ya - \omega t)]$$

waarin $\omega > 0$ en a de afstand is tussen naaste buren. Toon aan dat

$$\omega^2 M = 2C(2 - \cos K_xa - \cos K_ya).$$

Dit is de dispersierelatie voor het probleem, en wel de exakte. Het antwoord is gemakkelijk te generaliseren tot 3D en te reduceren tot het geval van 1D.

c. Schets $\omega$ tegen K voor $K = K_x$ met $K_y = 0$, en voor $K_x = K_y$.

d. Toon aan dat voor lange golflengten ($Ka \ll 1$) de exakte dispersierelatie de gedaante krijgt van de dispersierelatie voor een continu medium (Debye-benadering).

25. Warmtecapaciteit van een 1D rooster

[Kittel 6.1]

Toon aan dat de warmtecapaciteit van een mono-atomisch 1D rooster in de Debye approximatie evenredig is met $T/\Theta$ voor temperaturen $T \ll \Theta$, waarin $\Theta = \hbar\pi v/k_B a$ de Debye-temperatuur is.

26. Hall-effect met 2 typen ladingsdragers

Als n en p de concentraties zijn van elektronen en gaten, toon dan aan dat de Hall-constante gelijk is aan

$$R_H = \frac{p-n}{e(p+n)^2},$$

(Opmerking: verschillen in de "mobiliteit" van de ladingsdragers hebben we hier achterwege gelaten).

27. Pauli-paramagnetisme van geleidingselektronen

[Dit is vermeld in de meeste leerboeken; probeert u het echter zelf te vinden!]

Vele niet-ferromagnetische metalen zijn zwak paramagnetisch, waarbij de susceptibiliteit onafhankelijk van de temperatuur blijkt te zijn. Pauli heeft in 1927 aangetoond dat dit een consequentie is van de Fermi-Dirac karakteristiek. In een veld B zijn de energieën van elektronen met spin ↑ resp. ↓ verschillend:

$$\varepsilon = \varepsilon_{kin} \mp \mu B.$$

De elektronen met spin ↑ en spin ↓ vormen een gezamenlijk Fermi-niveau $\varepsilon = \varepsilon_F$ , terwijl de dichtheid van de energietoestanden gegeven blijft door $\mathcal{D}(\varepsilon_{kin})$.
Er zijn nu meer elektronen met spin ↑ dan met spin ↓ ($N_+ > N_-$). Ga dit na! Toon verder aan dat, als $\mathcal{D}(\varepsilon_F)$ de dichtheid van energietoestanden aan het Fermi-niveau is, de magnetisatie geinduceerd door B bij T = OK gelijk is aan (per elektron)

$$M = \mu(N_+ - N_-) \approx \mu^2 \mathcal{D}(\varepsilon_F)B.$$

Overtuig u er tenslotte van dat het Pauli-paramagnetisme (onder normale omstandigheden) onafhankelijk van de temperatuur is.